機械学習と数理モデル

順問題と逆問題のデータ駆動型解法

武石 直也（東京大学）

2024-10-22
日本地震学会2024年度秋季大会

本講演の内容

① 機械学習で数理モデルの順問題を解く

② 機械学習で数理モデルの逆問題を解く

③ 機械学習と数理モデルのハイブリッドモデリング

※ 整理のための分類にすぎず、考え方や手法には共通する部分が多くあります

機械学習で数理モデルの**順問題**を解く

PINNs, DGM, neural operators

「順問題」とは

- 例えば、Navier–Stokes方程式：

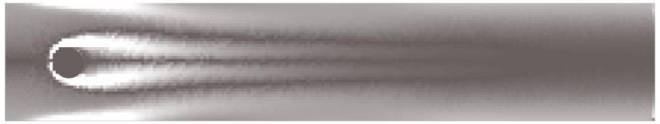
$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla)\boldsymbol{v} = \boldsymbol{g} - \frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{\mu}{\rho}\nabla^2 \boldsymbol{v}$$

  - この方程式を解くとは、↑を満たす未知量（関数） $\boldsymbol{v}$ と p を求めること
  - 数値的な解でもよい

- パラメタ、初期/境界条件を決めて、方程式を解くことを**順問題**と定義

パラメタ: レイノルズ数

初期条件



モデル
(N-S eq.)

解 $\boldsymbol{v}(t, \boldsymbol{x})$

微分方程式の深層学習による解法: PINN / DGM

- 偏微分方程式

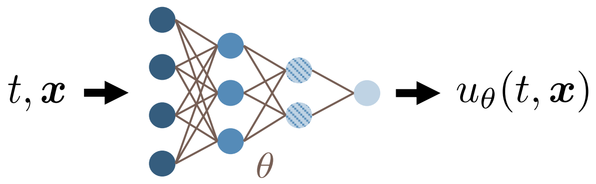
$$\frac{\partial u(t,\boldsymbol{x})}{\partial t} - Lu(t,\boldsymbol{x}) = 0 \quad \text{for} \quad t \in [0,T],\ \boldsymbol{x} \in \Omega$$

- 初期条件、境界条件

$$u(t_0,\boldsymbol{x}) = u_0(\boldsymbol{x}) \quad \text{for} \quad \boldsymbol{x} \in \Omega$$
$$u(t,\boldsymbol{x}) = g(t,\boldsymbol{x}) \quad \text{for} \quad t \in [0,T],\ \boldsymbol{x} \in \partial\Omega$$

学習すべきパラメタ

- ニューラルネット $u_\theta(t,\boldsymbol{x})$ で解 u を表す [Raissi+ 2019]



$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \sum_{t,\boldsymbol{x}\in[0,T]\times\Omega} \left\| \frac{\partial u_\theta(t,\boldsymbol{x})}{\partial t} - Lu_\theta(t,\boldsymbol{x}) \right\|^2 + \sum_{\boldsymbol{x}\in\Omega} \left\| u_\theta(t_0,\boldsymbol{x}) - u_0(\boldsymbol{x}) \right\|^2 + \sum_{t,\boldsymbol{x}\in[0,T]\times\partial\Omega} \left\| u_\theta(t,\boldsymbol{x}) - g(t,\boldsymbol{x}) \right\|^2$$

微分方程式の残差　　初期条件　　境界条件

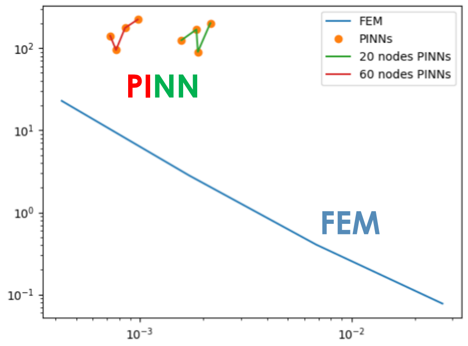
深層学習による微分方程式解法の利点

- メッシュフリーな表現
- 任意の点で観測データを使える
  - 微分方程式と観測データの両方にフィットさせる
- 数値解析より高速な場合もある
  - ホントか？ [Grossmann+ 2023]

（３次元ポアソン方程式の場合のみ、評価で有利）

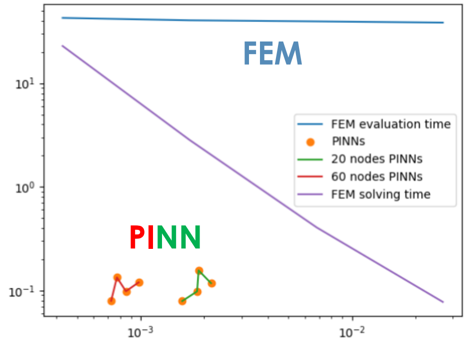
FEMの計算 / PINNの訓練

実行時間 [秒]



近似解の誤差

FEMの補間 / PINNの評価



近似解の誤差

figures from Grossmann+ (2023)

関連資料

- S. Wang, S. Sankaran, H. Wang, P. Perdikaris: “An Expert's Guide to Training Physics-informed Neural Networks”, arXiv:2308.08468

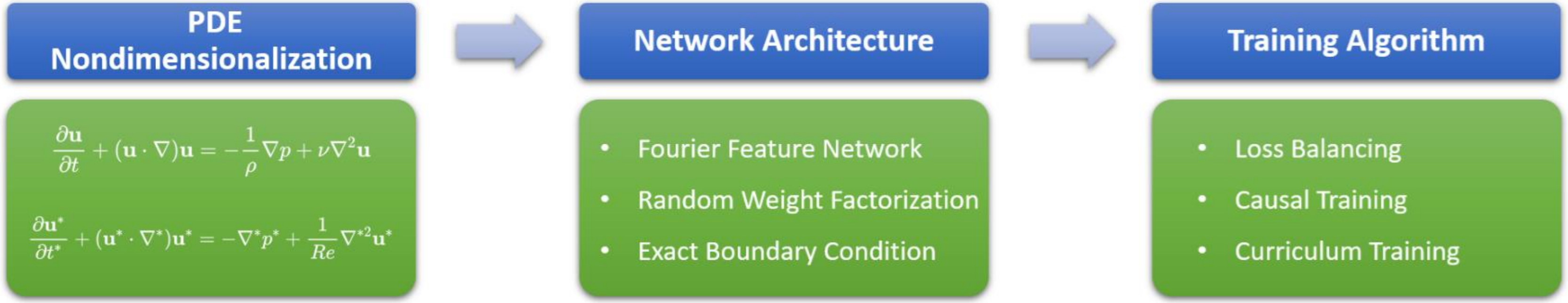


figure from Wang+ 2023

- PINNpapers
  - https://github.com/idrl-lab/PINNpapers
  - PINN関連論文のまとめ

関連キーワード

- Physics-informed neural networks (PINNs) [Raissi+ 2019]
- Deep Galerkin method (DGM) [Sirignano+ 2018]
  - PINN と concurrent work だと思われる
- Neural operators [Li+ 2021; Lu+ 2021; Kovachki+ 2023] （よく知られた手法だが、今回は割愛）
  - 特定の初期/境界条件での特殊解を学習するのではなく、
    初期条件 ↦ 時刻tでの解 のような、関数 ↦ 関数の作用素をデータから学習する

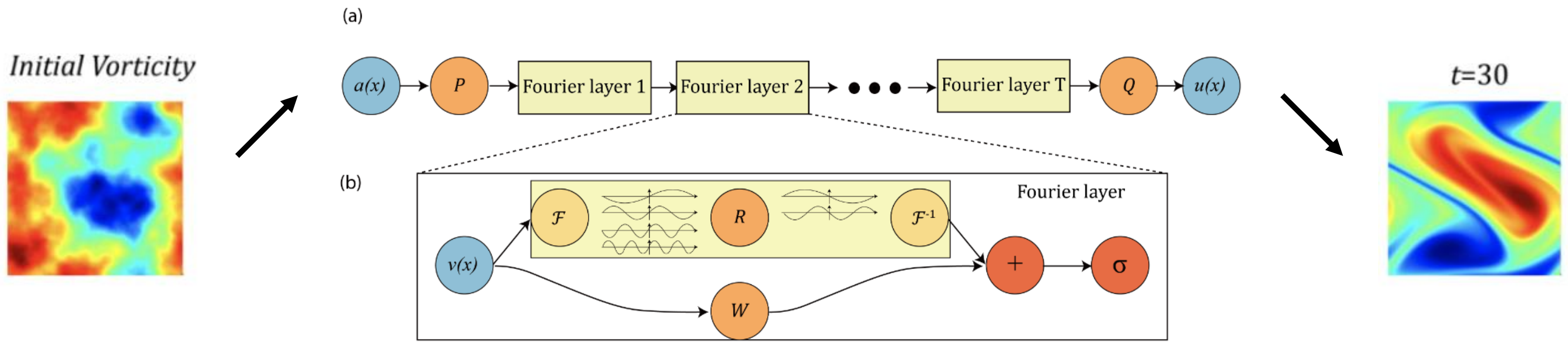


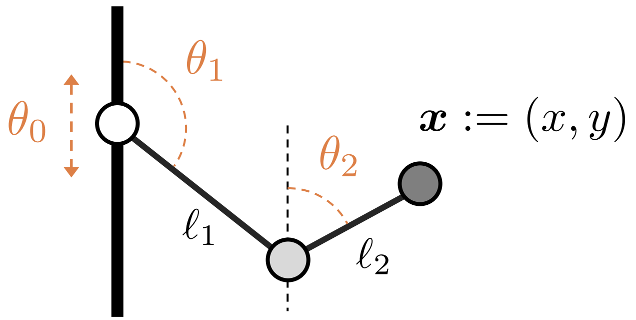
figure from Li+ (2021) with modification

機械学習で数理モデルの逆問題を解く

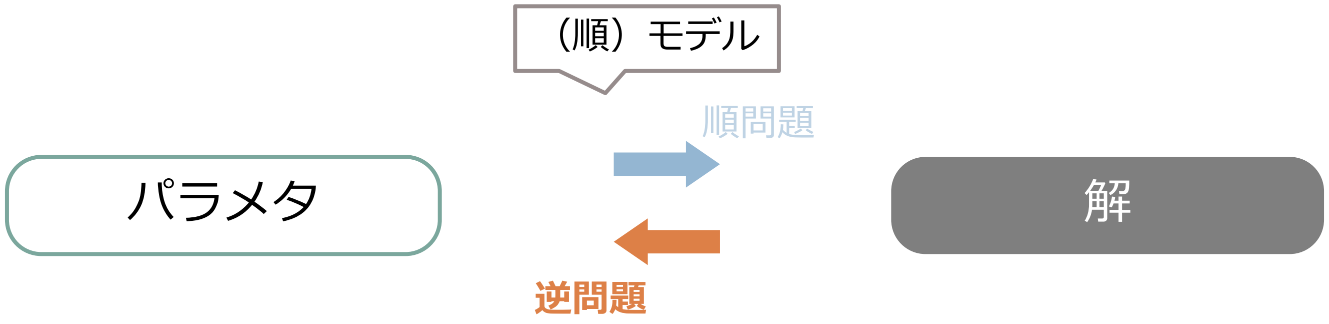
simulation-based inference

「逆問題」とは

- 例えば、逆運動学
  - 順モデル: $(\theta_0, \theta_1, \theta_2) \mapsto (x, y)$
  - 観測 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{o}} := (x_{\mathrm{o}}, y_{\mathrm{o}})$ が与えられたとき、それに対応するパラメタ $(\theta_0, \theta_1, \theta_2)$ の値を求める
    - 腕の長さ ℓ_1, ℓ_2 は順モデルの一部としてわかっているとする

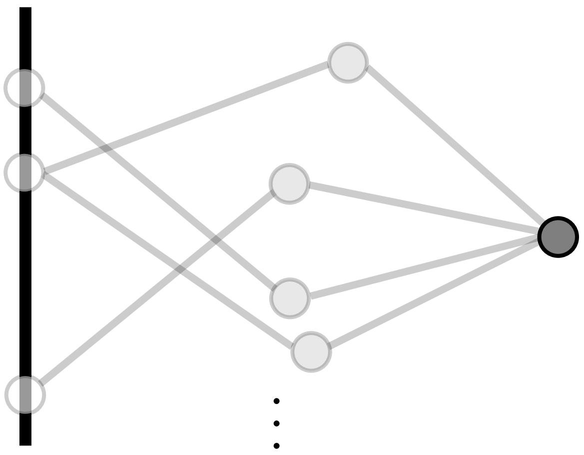


- 観測（得るべき解）と順モデルを決めて、対応するパラメタを求めるのを**逆問題**と定義



劣決定な逆問題

- ある $\boldsymbol{x}$ を実現する $\boldsymbol{\theta} := (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ がいくつも（無数に）ある



- 正則化　何らかの規準 $g(\boldsymbol{\theta})$ を設定して、「好ましい」$\boldsymbol{\theta}$ を選択
- **ベイズ推論**　事前分布 $p(\boldsymbol{\theta})$ を設定して、事後分布 $p(\boldsymbol{\theta} \mid \boldsymbol{x})$ を推論

ベイズ的逆問題

- ベイズの定理

Headache 2.
順モデルで決まる
観測の分布（尤度）

パラメタ事後分布
（ほしいもの）

$$p(\boldsymbol{\theta} \mid \boldsymbol{x}) = \frac{p(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta})}{p(\boldsymbol{x})}$$

パラメタ事前分布
（所与とする）

$$= \int p(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta})\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}$$

Headache 1.
観測の周辺分布

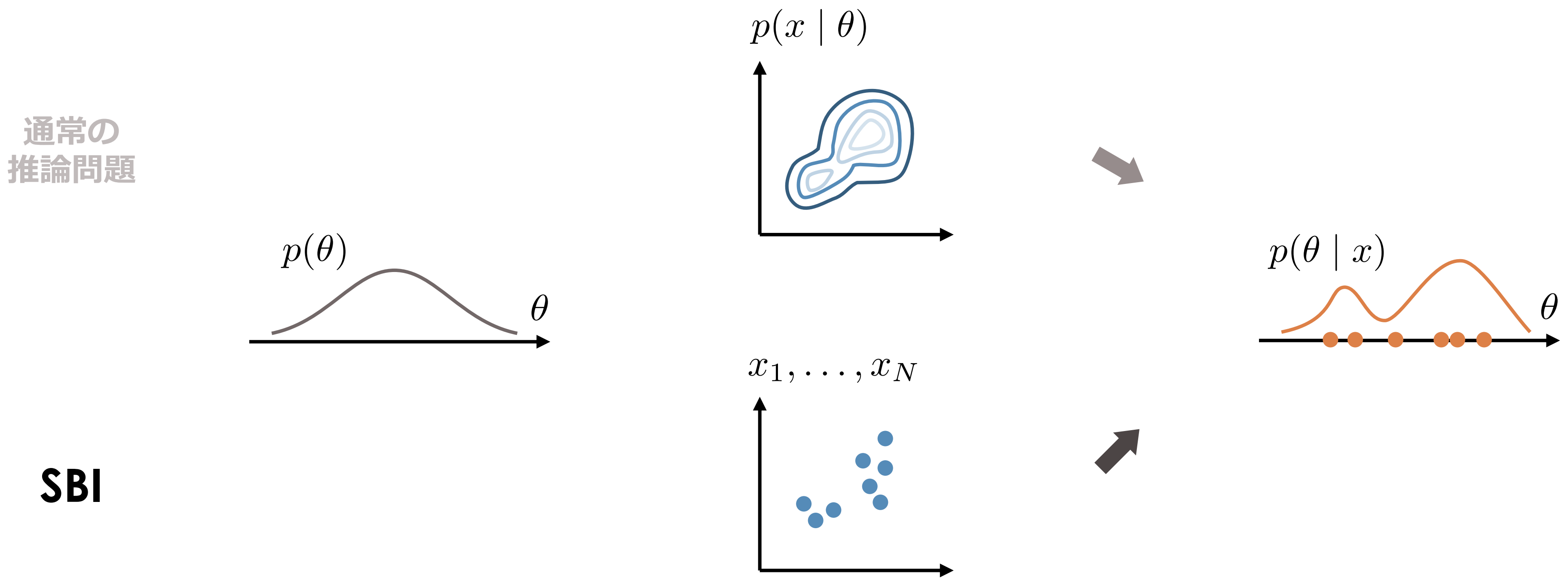
- 周辺分布 $p(\boldsymbol{x})$ の計算はだいたい難しい
  - 変分推論（variational inference）による近似
  - マルコフ連鎖モンテカルロ（MCMC）法によるサンプリング

尤度 $p(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\theta})$
の計算が必要

- 尤度 $p(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\theta})$ は順モデルとしてあるはずでは？ → そうでもない

Simulation-based inference

- 尤度関数 $p(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\theta})$ の値を計算せず、事後分布 $p(\boldsymbol{\theta} \mid \boldsymbol{x})$ を推論する問題
  - 「尤度なし推論（likelihood-free inference）」 または
    「シミュレーションに基づく推論（simulation-based inference; **SBI**）」
  - 同じことを指すはずだが、最近の深層学習ベースの方法では SBI と呼ぶ傾向



Approximate Bayesian computation (ABC)

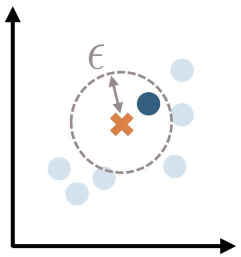
- 観測 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{o}}$ が与えられたとき、事後分布 $p(\boldsymbol{\theta} \mid \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_{\mathrm{o}})$ （からのサンプル）を得たい
  - 事前分布 $p(\boldsymbol{\theta})$ （から $\boldsymbol{\theta}$ を生成する機械）；および
  - シミュレータ: $p(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\theta})$ から $\boldsymbol{x}$ を生成する機械　をもっている

- ABC rejection

$\boldsymbol{x}$ を比較するための
特徴量抽出器

Input　事前分布，シミュレータ，観測 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{o}}$，閾値 ϵ，統計量 S
Output　保存したサンプルの集合 $\{\boldsymbol{\theta}\}$

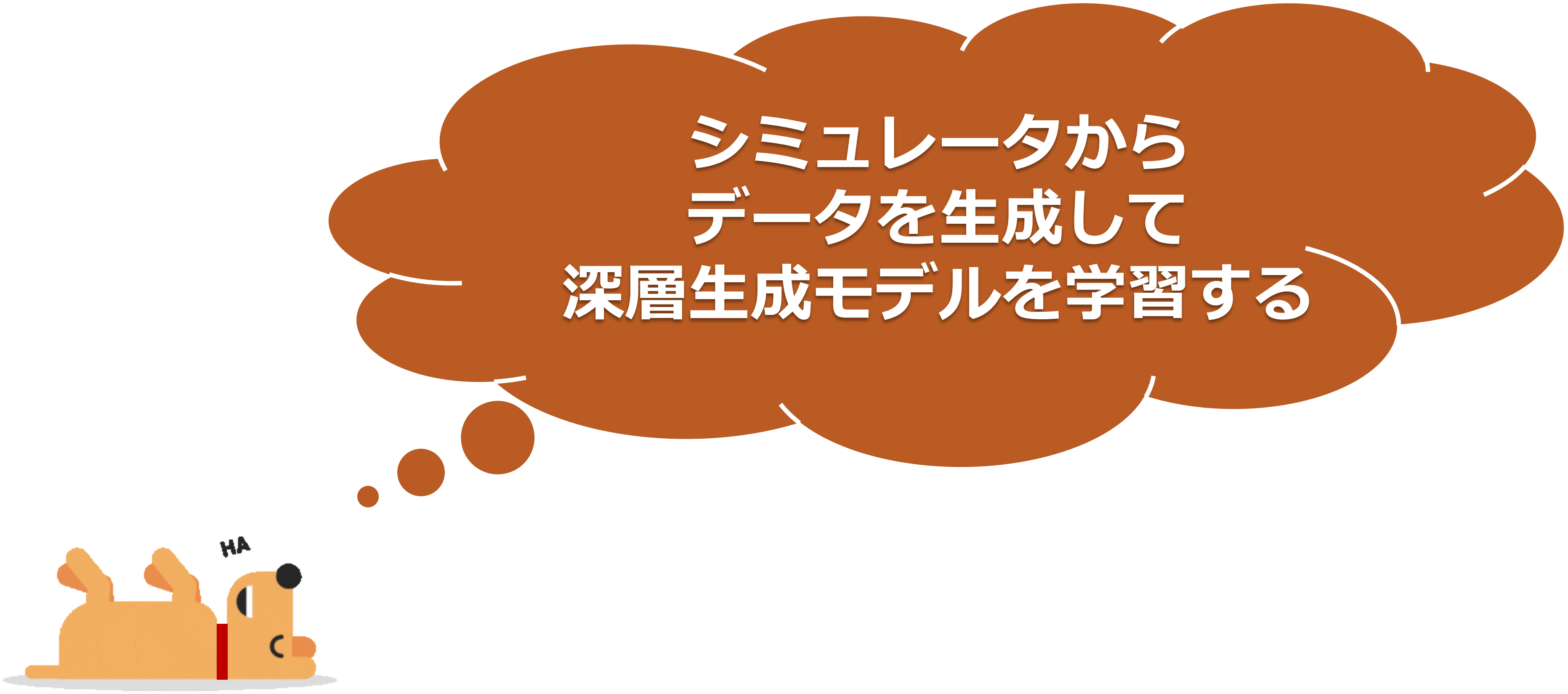
$i = 1, \ldots, N$ について、
　事前分布とシミュレータから $(\boldsymbol{\theta}_i, \boldsymbol{x}_i)$ を生成
　$\|S(\boldsymbol{x}_i) - S(\boldsymbol{x}_{\mathrm{o}})\| < \epsilon$ なら $\boldsymbol{\theta}_i$ を保存



  - 十分統計量 S と閾値 ϵ をいい感じに決めなくてはいけない
  - 観測 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{o}}$ が入ってくるたびにシミュレータを多数回実行する必要がある

深層学習によるSBI: 発想

- 発想は簡単



深層学習によるSBI: 事後分布を直接学習（NPE）

- 観測 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{o}}$ が与えられたとき、事後分布 $p(\boldsymbol{\theta} \mid \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_{\mathrm{o}})$ （からのサンプル）を得たい
- Neural posterior estimation (NPE)

基本的には
一度だけ実行

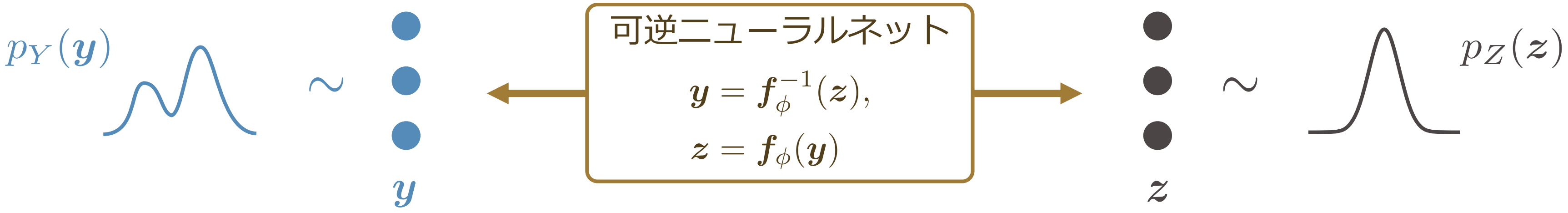
Input　事前分布，シミュレータ
Output　ニューラルネットによる事後分布の近似 $q_\phi(\boldsymbol{\theta} \mid \boldsymbol{x})$
1　$i = 1, \ldots, N$ について、
2　　事前分布とシミュレータから、$(\boldsymbol{\theta}_i, \boldsymbol{x}_i)$ を生成して保存
3　保存した $\{(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{x})\}$ から、事後分布 $q_\phi(\boldsymbol{\theta} \mid \boldsymbol{x})$ （normalizing flowsなど）を学習

↓

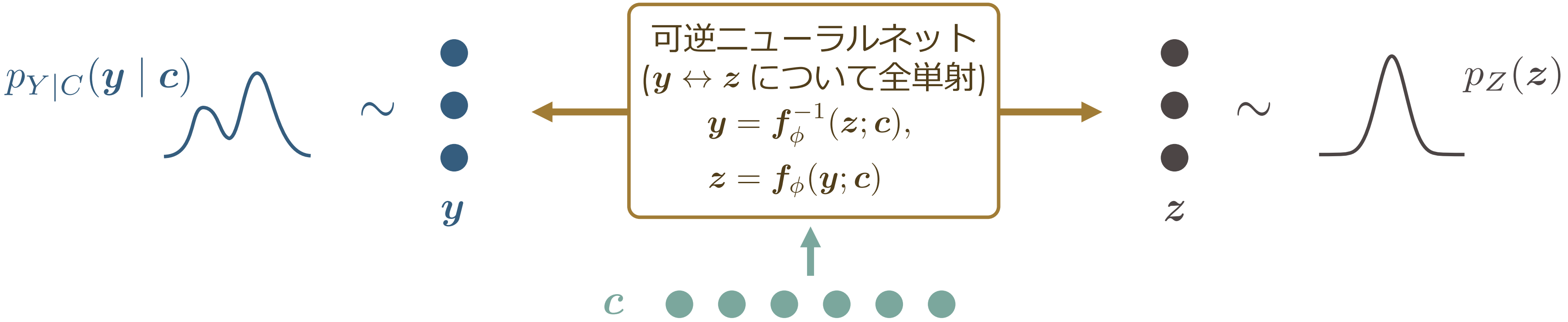
Input　観測 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{o}}$，近似した事後分布 $q_\phi(\boldsymbol{\theta} \mid \boldsymbol{x})$
Output　事後分布の評価値 $q(\boldsymbol{\theta} \mid \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_{\mathrm{o}})$
1　　$q(\boldsymbol{\theta} \mid \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_{\mathrm{o}})$ を計算

条件付き分布を normalizing flows で学習する

- Normalizing flows: $p_Y(\boldsymbol{y}) = p_Z\big(\boldsymbol{f}_\phi(\boldsymbol{y})\big)\left|\dfrac{\partial \boldsymbol{f}_\phi(\boldsymbol{y})}{\partial \boldsymbol{y}}\right|$



- Conditional normalizing flows: $p_{Y|C}(\boldsymbol{y} \mid \boldsymbol{c}) = p_Z\big(\boldsymbol{f}_\phi(\boldsymbol{y};\boldsymbol{c})\big)\left|\dfrac{\partial \boldsymbol{f}_\phi(\boldsymbol{y};\boldsymbol{c})}{\partial \boldsymbol{y}}\right|$



深層学習によるSBIの利点

- Normalizing flows などにより、複雑な事後分布を直接表現できる
  - 最近では flow matching による continuous NF による柔軟なモデル [Wildberger+ 2023]

- シミュレーションの実行は、基本的には※データ生成時のみに起こる
  - 新たな観測に対する事後分布推論は、NNの実行だけ

  ※一部の方法では、新たな観測に対してデータ生成とモデル訓練が新たに発生

- ちなみに: PINNも逆問題に使える
  - 実際、多くの研究でPINNによる「逆問題」が扱われている
  - PINNに未知パラメタも入力して、同時に推定 または 後から最適化
  - PINNを微分可能なサロゲートとしている … neural likelihood estimation と同様

SBI-based ANT

- Ambient noise tomography などをSBIで高速化
- UniGE, HES-SO（スイス）とIGG（イタリア）によプロジェクト

Fonds national suisse

Portail de données

MIGRATE - A Multidisciplinary and InteGRated Approach for geoThermal Exploration

Matteo Lupi, Alexandros Kalousis, Domenico Montanari

01.11.2022 – 31.10.2026

Aperçu

Numéro de projet

209434

Instrument d'encouragement

Sinergia

Mise au concours

Sinergia 2021 Dezember

Montant accordé

2 315 136 CHF

Statut

En cours

Institution de recherche

Université de Genève - GE

SBIの結果の信頼性

- SBIによる分布は、最頻値周りに過剰に集中した状態（overconfident）であることが多い [Hermans+ 2022]
  - 実験的な結果による報告
- false discovery の危険性

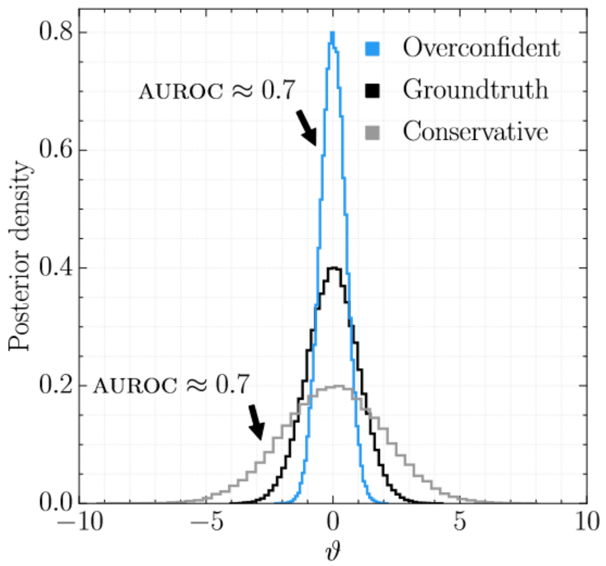


figure from Hermans+ (2022)

Overconfidence のはかり方

- 推定した分布が、どの程度 overconfident（または underconfident = conservative）なのかを定量化したい
- 最高事後密度領域（highest posterior density region; HPDR）による定義
  - “推定した分布 q が overconfident”

    $\Leftrightarrow$ “正解の分布 p からのサンプルが q の $(1-\alpha)$-HPDR に入る割合 $< 1-\alpha$”

  $0 \le 1-\alpha \le 1$ でグラフを描いて、対角線からの符号付き面積をはかる

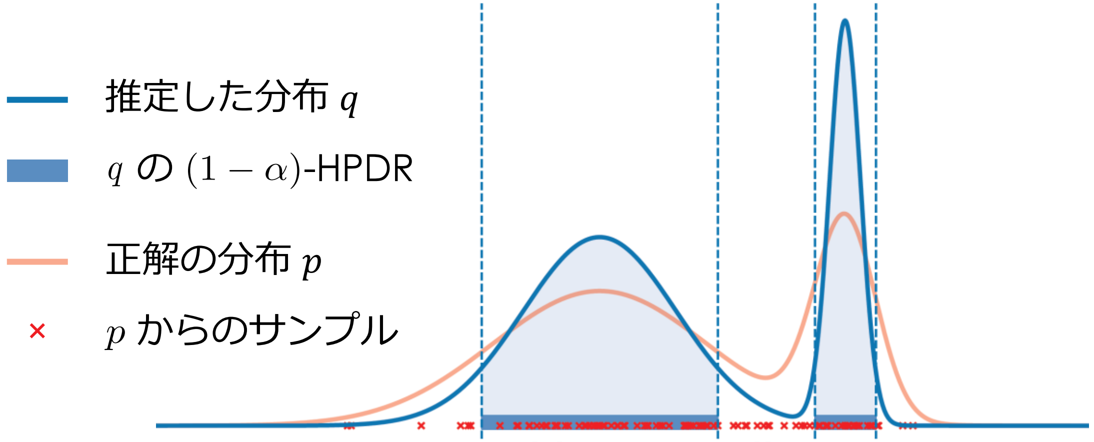
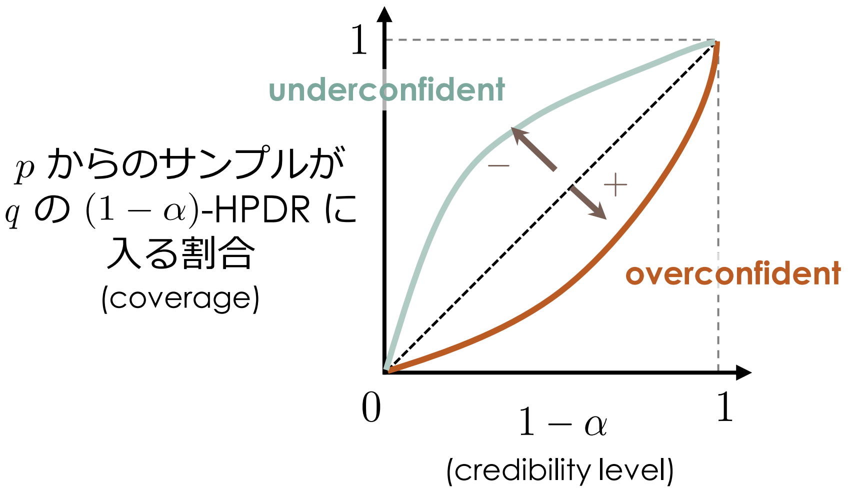
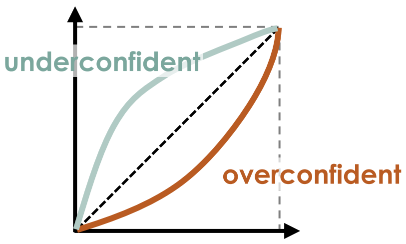


figure from Falkiewicz+ (2023) with slight modification





深層学習によるSBI

ABC

ベンチマークの名称

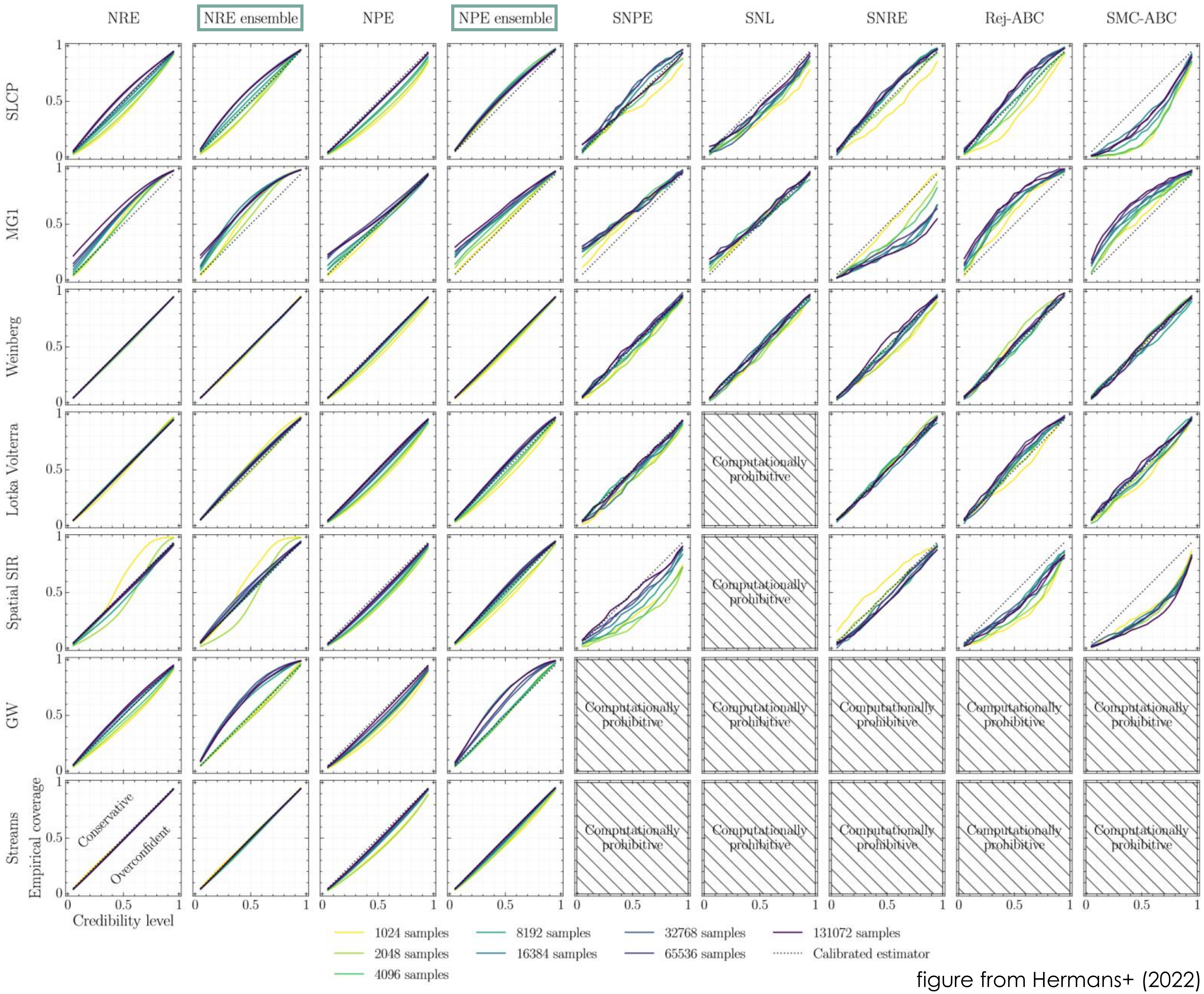


figure from Hermans+ (2022)

色 = 訓練や推論に使ったデータのサイズ

Overconfidence のふせぎ方

- 問題を指摘した論文 [Hermans+ 2022] では、アンサンブリングを提案
- NREで学習する二値分類器のキャリブレーション [Delaunoy+ 2022]
- Coverageを微分可能な形で計算して、直接正則化 [Falkiewicz+ 2023]
  - coverageは微分可能ソートで計算できる

Algorithm 1 Computing the regularizer loss with calibration objective.

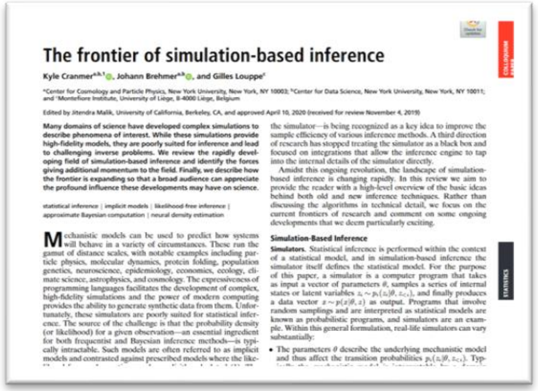
Require: Data batch $\{(\theta_i, x_i)\}_{i=1}^N$, model $\hat{p}(\theta|x)$, number of samples L, proposal distribution $I(\theta)$
Ensure: Regularizer's loss R

for $i \leftarrow 1$ to N **do**
  $p_i \leftarrow \hat{p}(\theta_i|x_i)$
  for $j \leftarrow 1$ to L **do**
    $\theta_i^j \sim I(\theta)$ ▷ sampling from proposal distribution
    $p_i^j \leftarrow \hat{p}(\theta_i^j|x_i)$
  end for
  $\hat{\alpha}_{\mathrm{HPDR}}^{L,IS}(\hat{p}, \theta_i, x_i) \leftarrow \frac{\sum_{j=1}^L p_i^j / I(\theta_i^j) \mathbb{1}[p_i^j < p_i]}{\sum_{j=1}^L p_i^j / I(\theta_i^j)}$ ▷ eq. (11)
end for
$(\alpha_i | i = 1, \ldots, N) \leftarrow \mathrm{sort}(\{\hat{\alpha}_{\mathrm{HPDR}}^{L,IS}(\hat{p}, \theta_i, x_i) | i = 1, \ldots, N\})$
$R \leftarrow \frac{1}{N} \sum_i^N (i/N - \alpha_i)^2$ ▷ the second term in eq. (12)

figure from Falkiewicz+ (2023)

関連資料

- K. Cranmer, J. Brehmer, G. Louppe:
  "The Frontier of Simulation-Based Inference,"
  PNAS **117**(48):30055-30062, 2020


The frontier of simulation-based inference
Kyle Cranmer, Johann Brehmer, and Gilles Louppe

- `sbi` [Tejero-Cantero+ 2020]
  - https://sbi-dev.github.io/sbi/
  - PyTorch と `nflows` をベースにしたSBIのライブラリ

- Awsome Neural SBI
  - https://github.com/smsharma/awesome-neural-sbi
  - 手法と応用の論文まとめ

- Simulation-based inference
  - https://simulation-based-inference.org/

SBI関連の論文は年々増加

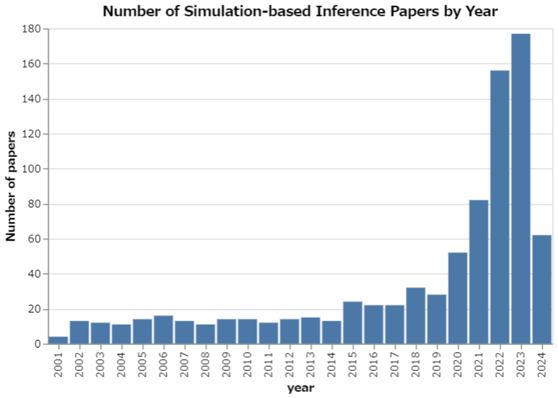


figure from https://simulation-based-inference.org/
retrieved on 2024-05-24

機械学習と数理モデルの
ハイブリッドモデリング

ハイブリッド（グレーボックス）モデリング

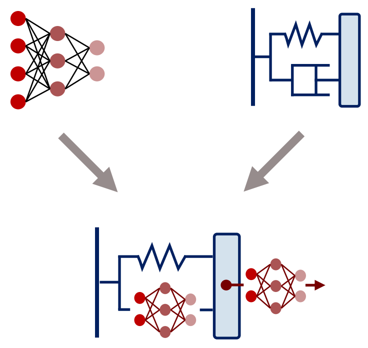
- 機械学習モデル
  （ニューラルネット, 決定木, カーネル法, ...）
  - 大量のパラメタをもつことがある
  - 同質かつ多量のデータが必要
  - 実際のデータに適応できる
  - 解釈しにくい

- 科学モデル
  （微分方程式, 数値計算, グラフ, 論理式, ...）
  - 少数のパラメタで表現される（べき）
  - 多様な少量のデータの蓄積
  - 抽象化・理想化のために実際のデータと合わないことがある
  - 理解に貢献

- 両者の「良いとこ取り」ができないか？
  - 予測をよりよく
  - 解釈しやすく

  できる**かも**

  - 融合の程度は様々
    - 「物理で出てくる構造っぽいのを使う」から「**具体的な微分方程式を使う**」まで



Hamiltonian neural networks [Greydanus+ 2019]

- ハミルトニアンをニューラルネットで構成

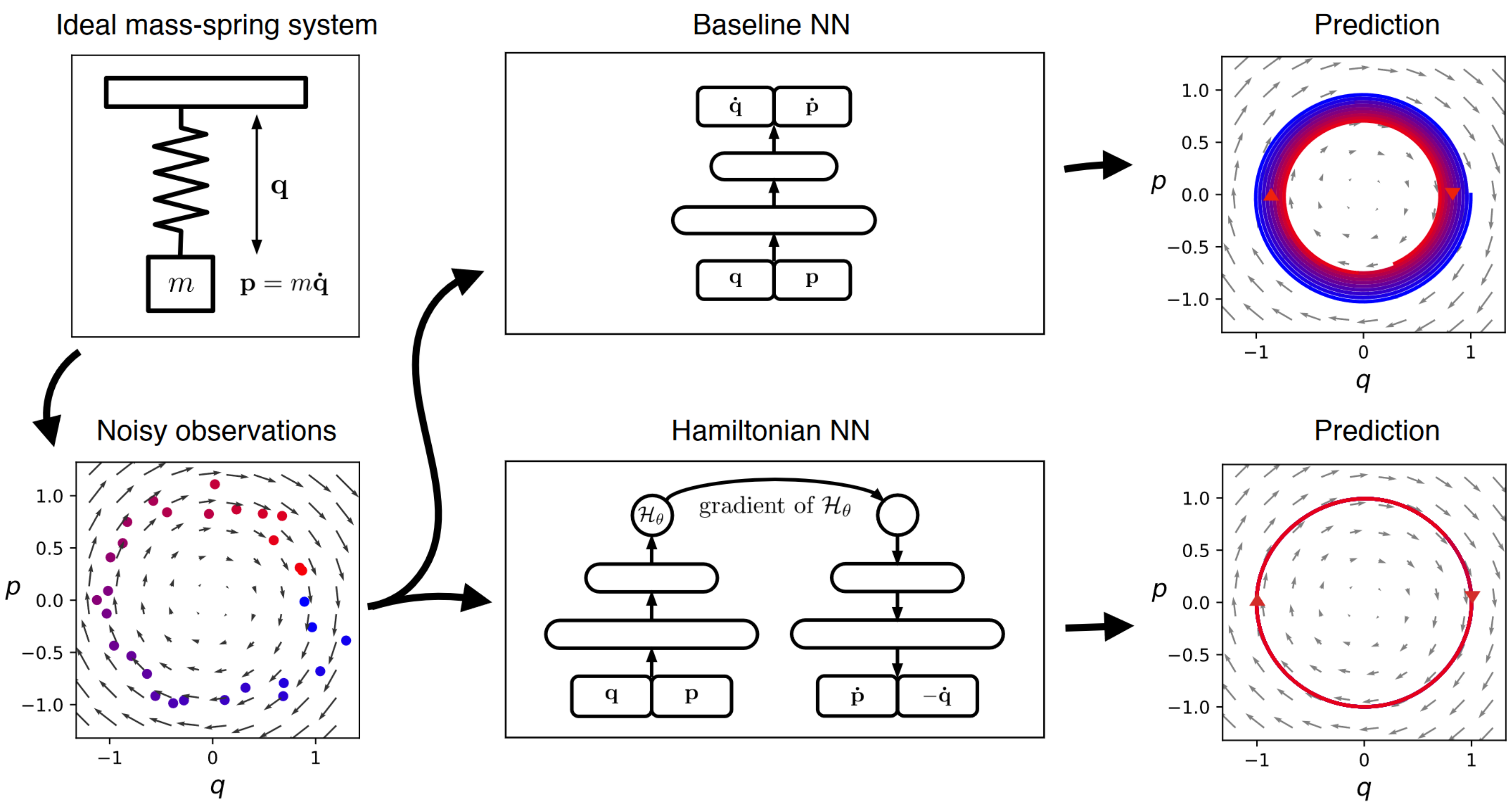
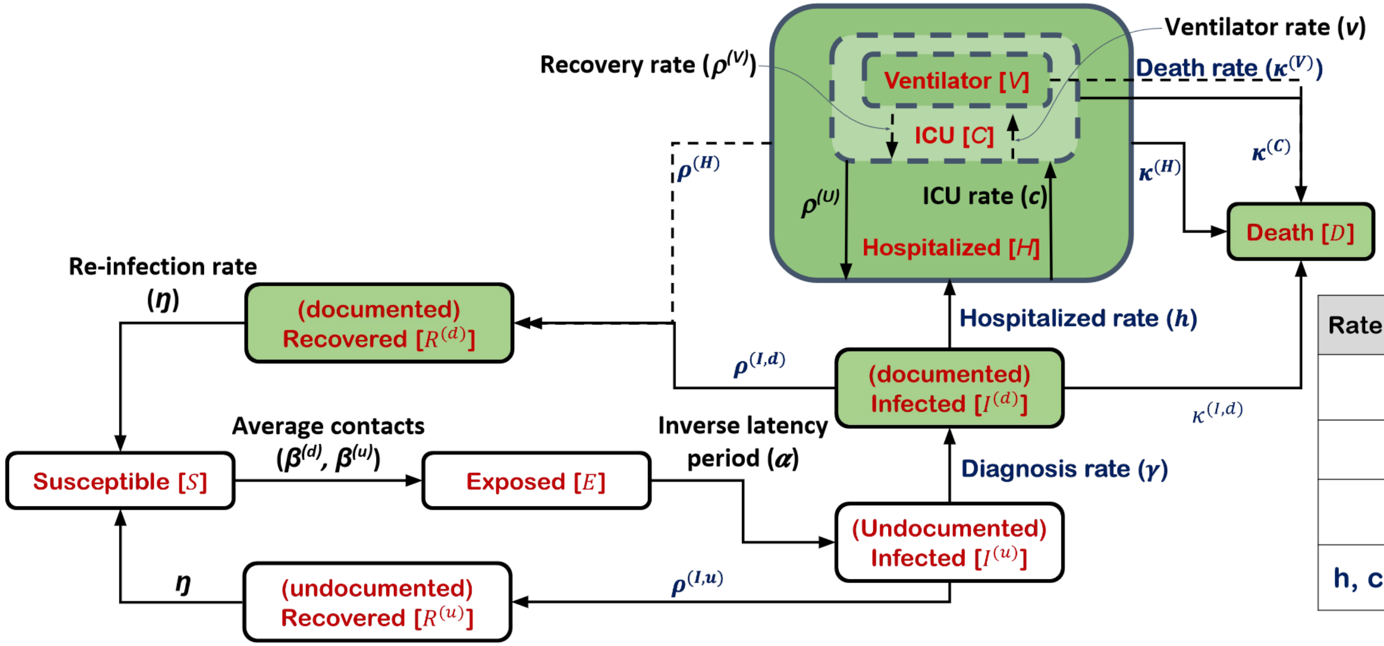
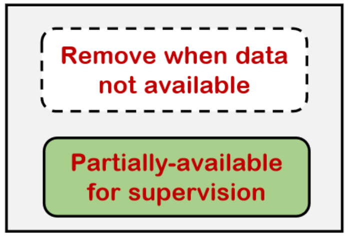


figure from Greydanus+ (2019)

COVID-19 感染者数予測 [Arık+ 2020]

- SIRモデルの係数を移動者数などの統計データから予測



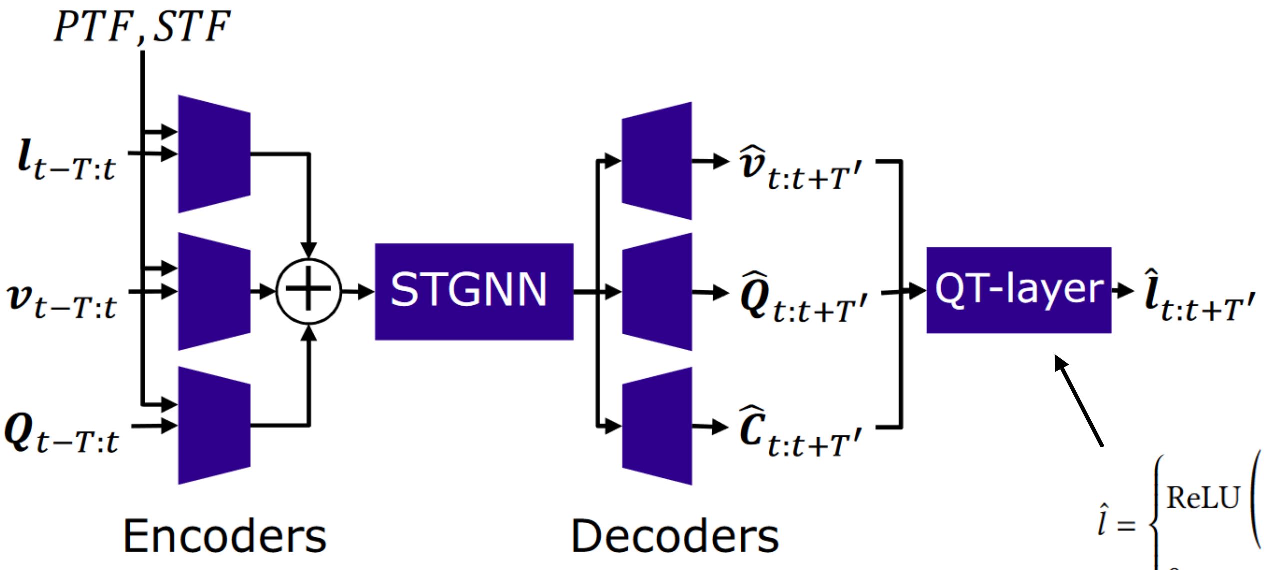


Rate variable	Covariates
β	Mobility, Interventions, Density, Past Counts
η	Census, Healthcare supply
γ	Census, Test count / pos. ratio, Past Counts
h, c, v, ρ, κ	Census, Econometrics, Healthcare supply

figure from Arık+ (2020)

渋滞長予測 [Shirakami+ 2023]

- 交通工学に基づくモデルの入力をGNNで予測



$$\hat{l} = \begin{cases} \mathrm{ReLU}\left(\dfrac{\hat{d}}{\frac{\rho_0 - a\hat{Q}}{\hat{Q}} - \frac{1}{v_0}} + \hat{C}\right) & \text{if } \hat{d} \geq 0 \text{ and } \frac{\rho_0 - a\hat{Q}}{\hat{Q}} - \frac{1}{v_0} > 0, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases}$$

figure from Shirakami+ (2023)

気象予測 [Verma+ 2024]

- 予測値が移流方程式に従うようにする

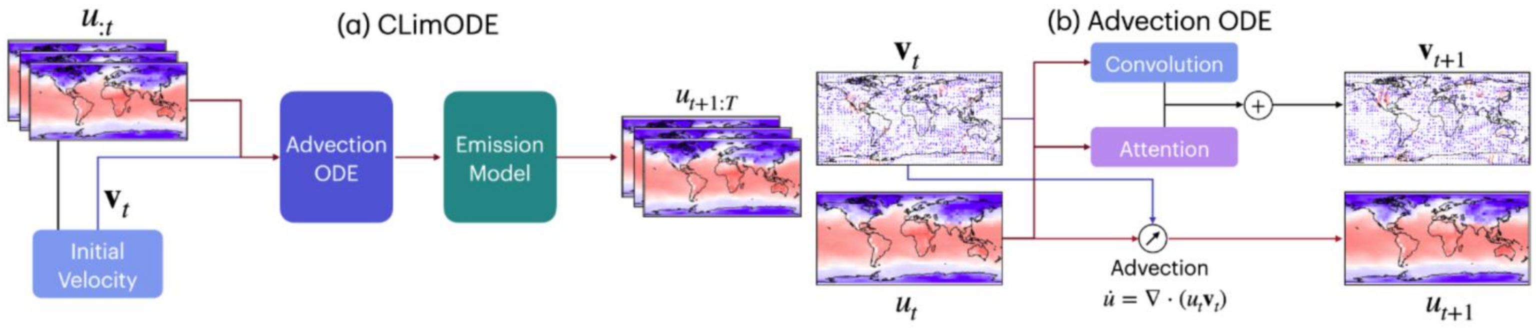
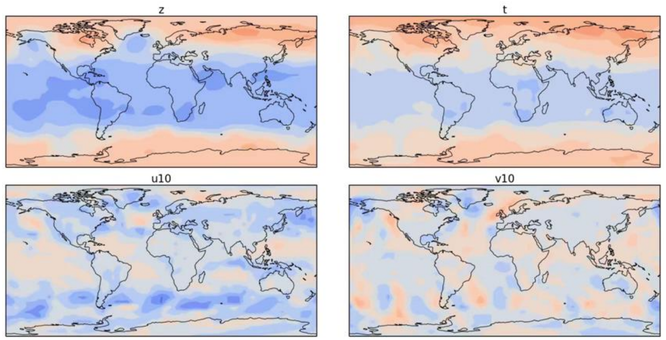


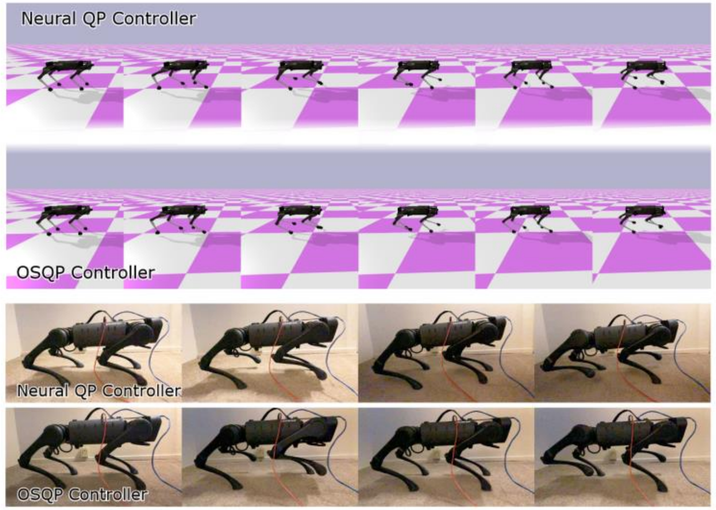
figure from Verma+ (2024)

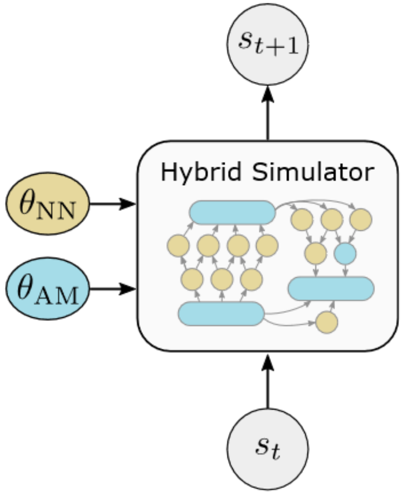


video from the project page of Verma+ (2024)
https://yogeshverma1998.github.io/ClimODE/

接触などのある剛体シミュレーション

- ロボットなどのシミュレーションでは、接触判定、摩擦力、空気力などの精緻な再現が難しい
  - 難しい部分は機械学習でデータから獲得
    [Ajay+ 2018; Hwangbo+ 2019; Zeng+ 2019; Golemo+ 2018; Heiden+ 2021]

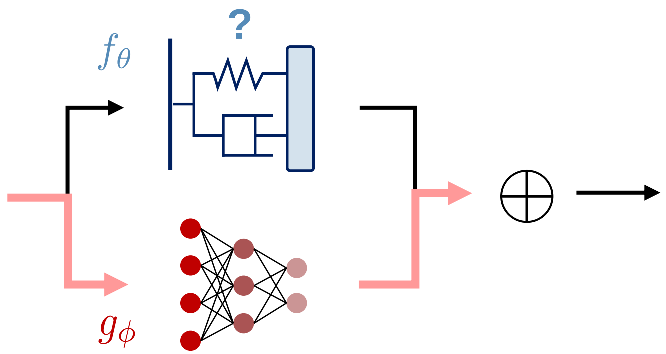




figures from Heiden+ (2021)

科学モデルの未知パラメタ推定

- 機械学習モデルが「外」にあるとき、科学モデルの未知パラメタがうまく推定できない可能性
  - 機械学習モデルだけでデータにフィットできてしまう

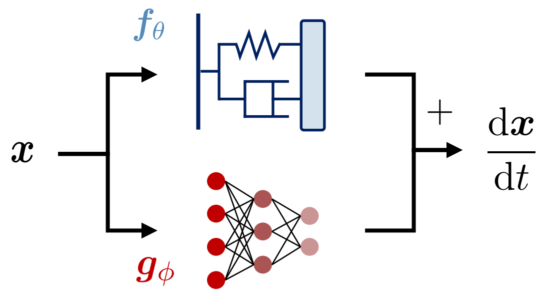


- 例えば、 $y = f_\theta(x) + g_\phi(x)$
  - $g_\phi(x)$ が $y - f_\theta(x)$ にフィットして、θ はなんでも良い、となってしまう
  - $g_\phi(x)$ の**過剰な表現力を抑える**べき

制約 / 正則化によるハイブリッドモデル学習　1/2

- 加法的ハイブリッドモデルの学習 [Yin+ 2021]
  - 特に、ハイブリッドな neural ODE:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{f}_\theta(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{g}_\phi(\boldsymbol{x}) \quad \ldots \ (\star)$$



  - 機械学習モデル $\boldsymbol{g}_\phi$ のノルムがなるべく小さくなるように学習

訓練データ

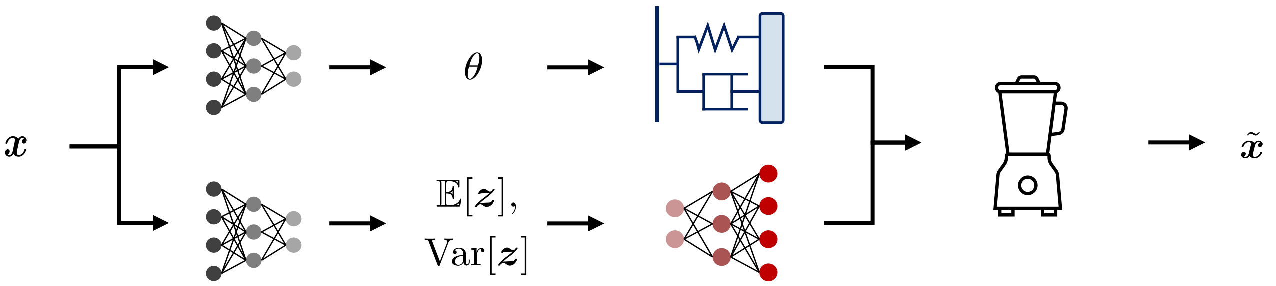
$$\underset{\theta,\phi}{\text{minimize}} \ \|\boldsymbol{g}_\phi\| \ \text{ s.t. } \ \forall \boldsymbol{X} \in \mathcal{D}, \ \boldsymbol{X} = \text{ODESolve}(\star)$$

訓練データ中のエピソード

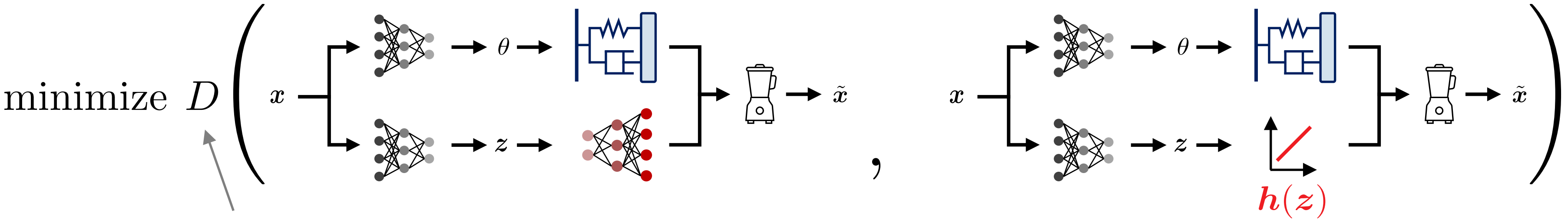
初期値問題ソルバ
（初期値は所与としたり、推定したり）

- 拡張ラグランジュ法で解く
- 関数ノルムで「表現力」をあらわすという考え方；自然だが、本当にそれだけか？

- より一般の結合方法を想定 [Takeishi & Kalousis 2021]
  - 特に、デコーダ部分がハイブリッドな変分オートエンコーダ



  - ハイブリッドモデルと「科学モデルだけの場合」の差を小さくなるよう正則化

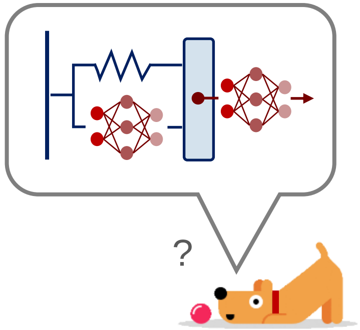


分布間の非類似度

NNを簡素なモデルで置き換える
（例えば $h(z) = 0, h(z) = Az + b$）

ハイブリッドモデリングのこれから

- まだ「始まった」ばかり
  - 自然な発想で古くから広く活用されているが、深層学習時代での探索はこれから
  - 定量的議論や厳密な計算が難しかった分野での応用
- 技術？
  - 学習の制約・正則化 ... 現状では限られたモデル構造しか扱えない
  - 科学モデルの「微分」
  - ハイブリッドモデルの自動構築
  - 残された機械学習モデルの（部分的）解釈 ......
- 考え方？
  - 機械学習を含むモデルは、どのように科学的理解に資するか？



まとめ

機械学習と科学研究で用いられる**数理モデル**の関わりについて、主に**手法の観点から**考え方と最近の話題を紹介

① 機械学習で数理モデルの**順問題**を解く
- PINNs, deep Galerkin … 微分方程式による損失関数

② 機械学習で数理モデルの**逆問題**を解く
- simulation-based inference … シミュレータから生成したデータで深層生成モデル

③ 機械学習と数理モデルの**ハイブリッドモデリング**
- 組み合わせ方や学習方法に注意が必要

参考文献 1/4

- A. Ajay et al., "Augmenting Physical Simulators with Stochastic Neural Networks: Case Study of Planar Pushing and Bouncing," in *Proceedings of the 2018 IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems*, pp. 3066–3073, 2018.
- S. Ö. Arık et al., "Interpretable Sequence Learning for COVID-19 Forecasting," in *Advances in Neural Information Processing Systems 33*, pp. 18807–18818, 2020.
- P. Berens, K. Cranmer, N. D. Lawrence, U. von Luxburg, and J. Montgomery, "AI for Science: An Emerging Agenda," arXiv:2303.04217, 2023.
- D. M. Blei, "Build, Compute, Critique, Repeat: Data Analysis with Latent Variable Models," *Annual Review of Statistics and Its Application*, vol. 1, no. 1, pp. 203–232, 2014.
- G. E. P. Box, "Science and Statistics," *Journal of the American Statistical Association*, vol. 71, no. 356, pp. 791–799, 1976.
- J. Brehmer, S. Mishra-Sharma, J. Hermans, G. Louppe, and K. Cranmer, "Mining for Dark Matter Substructure: Inferring Subhalo Population Properties from Strong Lenses with Machine Learning," *The Astrophysical Journal*, vol. 886, no. 1, p. 49, 2019.
- J. Brehmer, G. Louppe, J. Pavez, and K. Cranmer, "Mining Gold from Implicit Models to Improve Likelihood-Free Inference," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 117, no. 10, pp. 5242–5249, 2020.
- Y. Claes, V. A. Huynh-Thu, and P. Geurts, "Knowledge-Guided Additive Modeling for Supervised Regression," in *Discovery Science*, Lecture Notes in Computer Science, vol. 14276, pp. 64–78, 2023.
- K. Cranmer, J. Pavez, and G. Louppe, "Approximating Likelihood Ratios with Calibrated Discriminative Classifiers," arXiv:1506.02169, 2015.
- K. Cranmer, J. Brehmer, and G. Louppe, "The Frontier of Simulation-Based Inference," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 117, no. 48, pp. 30055–30062, 2020.
- E. de Bézenac, A. Pajot, and P. Gallinari, "Deep Learning for Physical Processes: Incorporating Prior Scientific Knowledge," *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2019, no. 12, 124009, 2019.
- A. Delaunoy, J. Hermans, F. Rozet, A. Wehenkel, and G. Louppe, "Towards Reliable Simulation-Based Inference with Balanced Neural Ratio Estimation," in *Advances in Neural Information Processing 35*, pp. 20025–20037, 2022.
- C. Durkan, I. Murray, and G. Papamakarios, "On Contrastive Learning for Likelihood-Free Inference," in *Proceedings of the 37th International Conference on Machine Learning*, pp. 2771–2781, 2020.
- M. Falkiewicz et al., "Calibrating Neural Simulation-Based Inference with Differentiable Coverage Probability," in *Advances in Neural Information Processing 36*, pp. 1082–1099, 2023.

参考文献 2/4

- F. Golemo, A. A. Taiga, A. Courville, and P.-Y. Oudeyer, “Sim-to-Real Transfer with Neural-Augmented Robot Simulation,” in *Proceedings of the 2nd Conference on Robot Learning*, pp. 817–828, 2018.
- D. S. Greenberg, M. Nonnenmacher, and J. H. Macke, “Automatic Posterior Transformation for Likelihood-Free Inference,” in *Proceedings of the 36th International Conference on Machine Learning*, pp. 2404–2414, 2019.
- S. Greydanus, M. Dzamba, and J. Yosinski, “Hamiltonian Neural Networks,” in *Advances in Neural Information Processing Systems 32*, pp. 15379–15389, 2019.
- T. G. Grossmann, U. J. Komorowska, J. Latz, and C.-B. Schönlieb, “Can Physics-Informed Neural Networks Beat the Finite Element Method?” arXiv:2302.04107, 2023.
- Z. Hao et al., “Physics-Informed Machine Learning: A Survey on Problems, Methods and Applications,” arXiv:2211.08064, 2022.
- E. Heiden, D. Millard, E. Coumans, Y. Sheng, and G. S. Sukhatme, “NeuralSim: Augmenting Differentiable Simulators with Neural Networks,” in *Proceedings of the 2021 IEEE International Conference on Robotics and Automation*, pp. 9474–9481, 2021.
- J. Hermans, V. Begy, and G. Louppe, “Likelihood-Free MCMC with Amortized Approximate Ratio Estimators,” in *Proceedings of the 37th International Conference on Machine Learning*, pp. 4239–4248, 2020.
- J. Hermans, A. Delaunoy, F. Rozet, A. Wehenkel, V. Begy, and G. Louppe, “A Trust Crisis in Simulation-Based Inference? Your Posterior Approximations Can Be Unfaithful,” *Transactions on Machine Learning Research*, 2022.
- J. Hwangbo et al., “Learning Agile and Dynamic Motor Skills for Legged Robots,” *Science Robotics*, vol. 4, no. 26, eaau5872, 2019.
- K. Kaheman, E. Kaiser, B. Strom, J. N. Kutz, and S. L. Brunton, “Learning Discrepancy Models from Experimental Data,” arXiv:1909.08574, 2019.
- G. E. Karniadakis, I. G. Kevrekidis, L. Lu, P. Perdikaris, S. Wang, and L. Yang, “Physics-Informed Machine Learning,” *Nature Reviews Physics*, vol. 3, pp. 422–440, 2021.
- C.-Y. Lai, P. Hassanzadeh, A. Sheshadri, M. Sonnewald, R. Ferrari, and V. Balaji, “Machine Learning for Climate Physics and Simulations,” arXiv:2404.13227, 2024.
- Z. Li et al., “Fourier Neural Operator for Parametric Partial Differential Equations,” in *Proceedings of the 9th International Conference on Learning Representations*, 2021.

参考文献 3/4

- L. Lu, X. Meng, Z. Mao, and G. E. Karniadakis, “DeepXDE: A Deep Learning Library for Solving Differential Equations,” *SIAM Review*, vol. 63, no. 1, pp. 208–228, 2021.
- L. Lu, P. Jin, G. Pang, Z. Zhang, and G. E. Karniadakis, “Learning Nonlinear Operators via DeepONet Based on the Universal Approximation Theorem of Operators,” *Nature Machine Intelligence*, vol. 3, pp. 218–229, 2021.
- B. K. Miller, C. Weniger, and P. Forré, “Contrastive Neural Ratio Estimation,” in *Advances in Neural Information Processing Systems 35*, pp. 3262–3278, 2022.
- D. Nganyu Tanyu et al., “Deep Learning Methods for Partial Differential Equations and Related Parameter Identification Problems,” *Inverse Problems*, vol. 39, no. 10, 103001, 2023.
- G. Papamakarios and I. Murray, “Fast ϵ-Free Inference of Simulation Models with Bayesian Conditional Density Estimation,” in Advances in *Neural Information Processing Systems 29*, pp. 1036–1044, 2016.
- G. Papamakarios, I. Murray, and T. Pavlakou, “Masked Autoregressive Flow for Density Estimation,” in *Advances in Neural Information Processing Systems 30*, pp. 2335–2344, 2017.
- G. Papamakarios, E. Nalisnick, D. J. Rezende, S. Mohamed, and B. Lakshminarayanan, “Normalizing Flows for Probabilistic Modeling and Inference,” *Journal of Machine Learning Research*, vol. 22, no. 57, pp. 1–64, 2021.
- G. Papamakarios, D. C. Sterratt, and I. Murray, “Sequential Neural Likelihood: Fast Likelihood-Free Inference with Autoregressive Flows,” in *Proceedings of the 22nd International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, pp. 837–848, 2019.
- M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis, “Physics-Informed Neural Networks: A Deep Learning Framework for Solving Forward and Inverse Problems Involving Nonlinear Partial Differential Equations,” *Journal of Computational Physics*, vol. 378, pp. 686–707, 2019.
- R. Ramakrishnan, P. O. Dral, M. Rupp, and O. A. von Lilienfeld, “Big Data Meets Quantum Chemistry Approximations: The Δ-machine Learning Approach,” *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 11, no. 5, pp. 2087–2096, 2015.
- M. Reichstein et al., “Deep Learning and Process Understanding for Data-Driven Earth System Science,” *Nature*, vol. 566, no. 7743, pp. 195–204, 2019.
- T. Salzmann, E. Kaufmann, J. Arrizabalaga, M. Pavone, D. Scaramuzza, and M. Ryll, “Real-Time Neural MPC: Deep Learning Model Predictive Control for Quadrotors and Agile Robotic Platforms,” *IEEE Robotics and Automation Letters*, vol. 8, no. 4, pp. 2397–2404, 2023.

参考文献 4/4

- R. Shirakami, T. Kitahara, K. Takeuchi, and H. Kashima, "QTNet: Theory-based Queue Length Prediction for Urban Traffic," in *Proceedings of the 29th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, pp. 4832–4841, 2023.
- J. Sirignano and K. Spiliopoulos, "DGM: A Deep Learning Algorithm for Solving Partial Differential Equations," *Journal of Computational Physics*, vol. 375, pp. 1339–1364, 2018.
- N. Takeishi and A. Kalousis, "Deep Grey-Box Modeling with Adaptive Data-Driven Models toward Trustworthy Estimation of Theory-Driven Models," in *Proceedings of the 26th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, pp. 4089–4100, 2023.
- N. Takeishi and A. Kalousis, "Physics-Integrated Variational Autoencoders for Robust and Interpretable Generative Modeling," in Advances in Neural Information Processing Systems 34, pp. 14809–14821, 2021.
- A. Tejero-Cantero et al., "sbi: A Toolkit for Simulation-Based Inference," *Journal of Open Source Software*, vol. 5, no. 52:2505, 2020.
- Y. Verma, M. Heinonen, and V. Garg, "ClimODE: Climate and Weather Forecasting with Physics-Informed Neural ODEs," in *Proceedings of the 12th International Conference on Learning Representations*, 2024.
- L. von Rueden et al., "Informed Machine Learning – A Taxonomy and Survey of Integrating Knowledge into Learning Systems," *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, vol. 35, no. 1, pp. 614–633, 2023.
- S. Wang, S. Sankaran, H. Wang, and P. Perdikaris, "An Expert's Guide to Training Physics-Informed Neural Networks," arXiv:2308.08468, 2023.
- A. Wehenkel et al., "Addressing Misspecification in Simulation-Based Inference through Data-Driven Calibration," arXiv:2405.08719, 2024.
- J. Willard, X. Jia, S. Xu, M. Steinbach, and V. Kumar, "Integrating Scientific Knowledge with Machine Learning for Engineering and Environmental Systems," *ACM Computing Surveys*, vol. 55, no. 4, p. 66:1-66:37, 2022.
- C. Winkler, D. Worrall, E. Hoogeboom, and M. Welling, "Learning Likelihoods with Conditional Normalizing Flows," arXiv:1912.00042, 2019.
- Y. Yin et al., "Augmenting Physical Models with Deep Networks for Complex Dynamics Forecasting," in *Proceedings of the 9th International Conference on Learning Representations*, 2021.
- A. Zeng, S. Song, J. Lee, A. Rodriguez, and T. Funkhouser, "TossingBot: Learning to Throw Arbitrary Objects with Residual Physics," in *Robotics: Science and Systems XV*, 2019.